

II.- METODOLOGÍA

II.1.- MEDIOS A UTILIZAR

II.1.1.- Base de datos CSD

Cambridge Structural Database, CSD, es una base de datos que contiene información cristalográfica de compuestos orgánicos y organometálicos. La mantiene y distribuye Cambridge Crystallographic Data Centre, CCDC, en el Reino Unido.

La versión 5.24 de noviembre de 2002 contiene información sobre 272.066 compuestos y con la actualización de febrero de 2003 hay que añadir 9.870 compuestos más.

La información se organiza en tres categorías:

- Información unidimensional: textos y artículos.
- Información bidimensional: diagramas químicos estructurales, propiedades atómicas y propiedades de enlace.
- Información tridimensional: descripción de la estructura cristalina.

Los principales programas que permiten analizar esa información son:

- *ConQuest 1.6*: se pueden realizar búsquedas empleando como condiciones datos de composición química, bibliográficos, estructurales, etc.
- *Vista*: analiza los resultados de las búsquedas efectuadas y los presenta en forma de tabla
- *Mercury*: visualiza las estructuras en 3D.

La CSD tiene unos registros o entradas mediante los que relaciona, en cada uno de ellos, una publicación individual con una estructura cristalina específica de la base de datos.

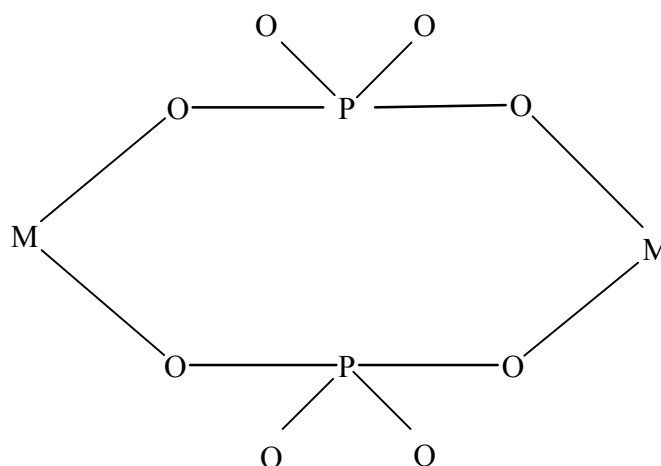
A cada entrada se le asigna un código o clave propio, *refcode*, compuesto de dos partes:

- la primera, de seis letras, que identifica a los componentes químicos, y
- la segunda, formada por dos dígitos adicionales, en la que el primero hace referencia a la publicación inicial (0) o a publicaciones posteriores del mismo estudio (1, 2, ...), mientras que el segundo dígito alude a experimentos posteriores sobre el mismo compuesto pero preparado a diferente temperatura o con otros disolventes, estudiado con radiaciones diferentes, etc.

Los *refcode* de todas las conformaciones utilizadas se recogen en el Apéndice 1.

II.1.1.1.- Programa *ConQuest*

Seguidamente vamos a describir brevemente el empleo del programa *ConQuest 1.6* para formular un algoritmo de búsqueda que nos permita hallar los compuestos metálicos dinucleares con doble puente O–P–O, como el del esquema de la Figura 27:



Puente de fosfato

Figura 27

Como el primer objetivo del trabajo es la búsqueda de todas las posibles conformaciones que cumplan la condición del esquema anterior, no habrá restricción alguna.

Para no extendernos demasiado en el uso del programa anterior, resumimos los diferentes pasos que hay que dar para construir el esquema que permitirá realizar la búsqueda que deseamos:

- 1º) Selección del metal.
- 2º) Introducción de los restantes elementos: P y O.
- 3º) Unión entre ellos hasta formar el esquema. En la pantalla del ordenador (Figura 28) aparecerá así:

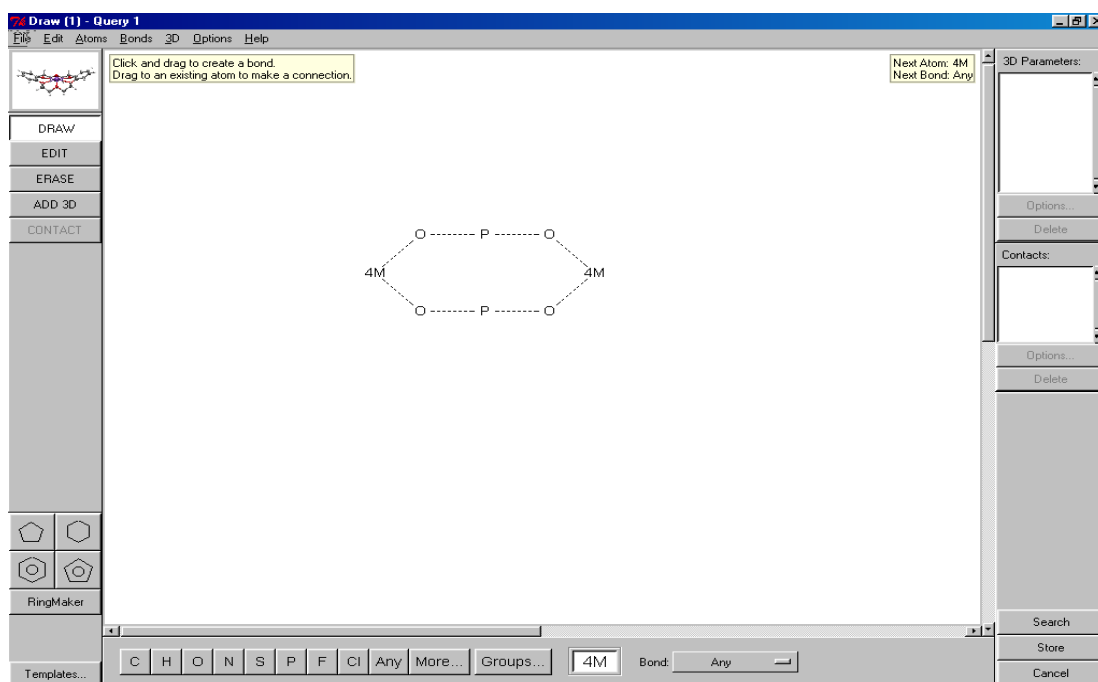


Figura 28

- 4º) Almacenamiento de la estructura definida como condición de búsqueda por defecto.
5º) Búsqueda mediante la opción *search*. Aparecerá en pantalla un cuadro como el de la Figura 29.

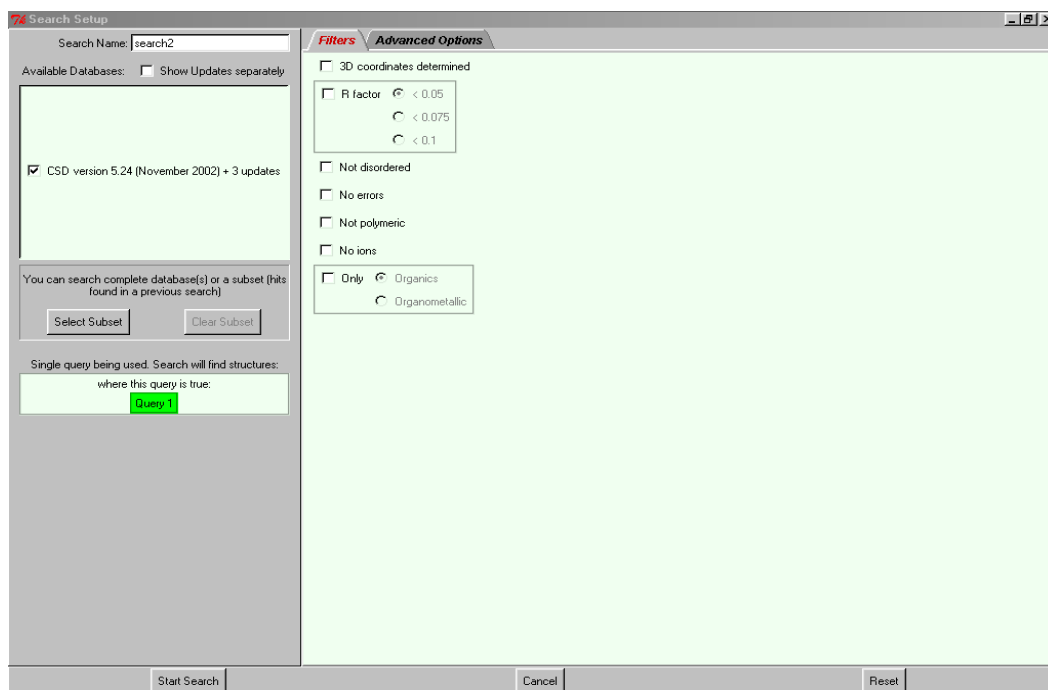


Figura 29

Aquí tenemos la posibilidad de imponer restricciones de búsqueda basadas en las condiciones de calidad con que se ha determinado la estructura pudiendo restringirla a compuestos con la estructura 3D determinada o no, a valores del factor R cualesquiera o inferiores a 0.1, 0.075 ó 0.05, eliminar o no las estructuras iónicas, etc.

Como ya señalamos anteriormente, no vamos a imponer restricciones.

6º) Obtención de resultados. Se ofrecen de la forma que se observa en la Figura 30:

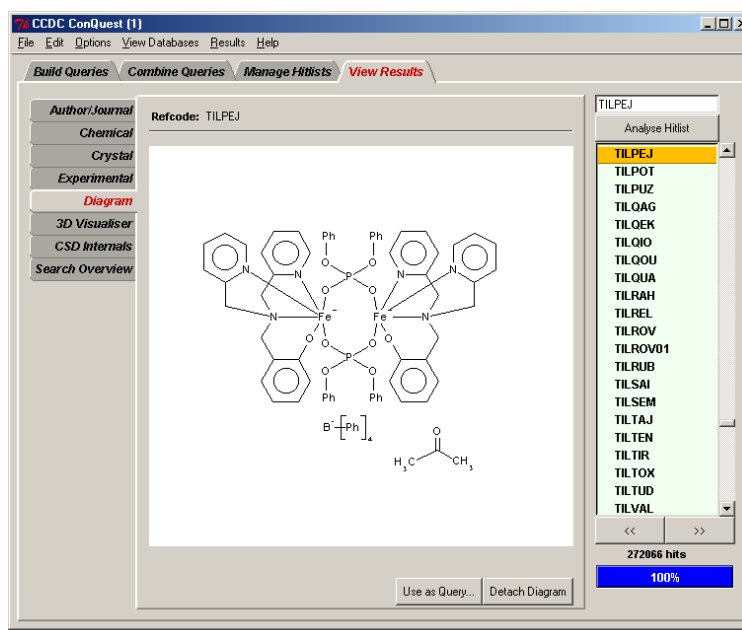


Figura 30

En el lado derecho de la pantalla aparecen los datos (*refcode*) como una vista secuencial ordenada alfabéticamente, recogándose a su pie el número total de estructuras seleccionadas (1078 en nuestro caso).

En la parte central, según cuál sea la pestaña del lado izquierdo que tenemos activada, podemos observar la información correspondiente al compuesto seleccionado en la lista; así podemos acceder a información bibliográfica, química, cristalográfica o experimental, al diagrama bidimensional (como el de la figura), a la estructura tridimensional, a los datos de identificación y clasificación de la CSD o a las condiciones de búsqueda impuestas para seleccionarla.

7º) Finalmente, se archivan los datos mediante un fichero con extensión .cqs.

La utilidad de tener guardada la búsqueda es múltiple ya que además de poder recuperarla en cualquier momento, podemos trabajar con ella sin tener que recurrir a toda la base de datos lo que hará que procesos tales como clasificar por metales los compuestos obtenidos sean más rápidos y sencillos.

II.1.1.2.- Programa *Mercury*

Este programa de ordenador es una de las herramientas más utilizadas en el presente Proyecto ya que permite visualizar estructuras cristalinas en tres dimensiones. En la Figura 31 se observa la pantalla principal:

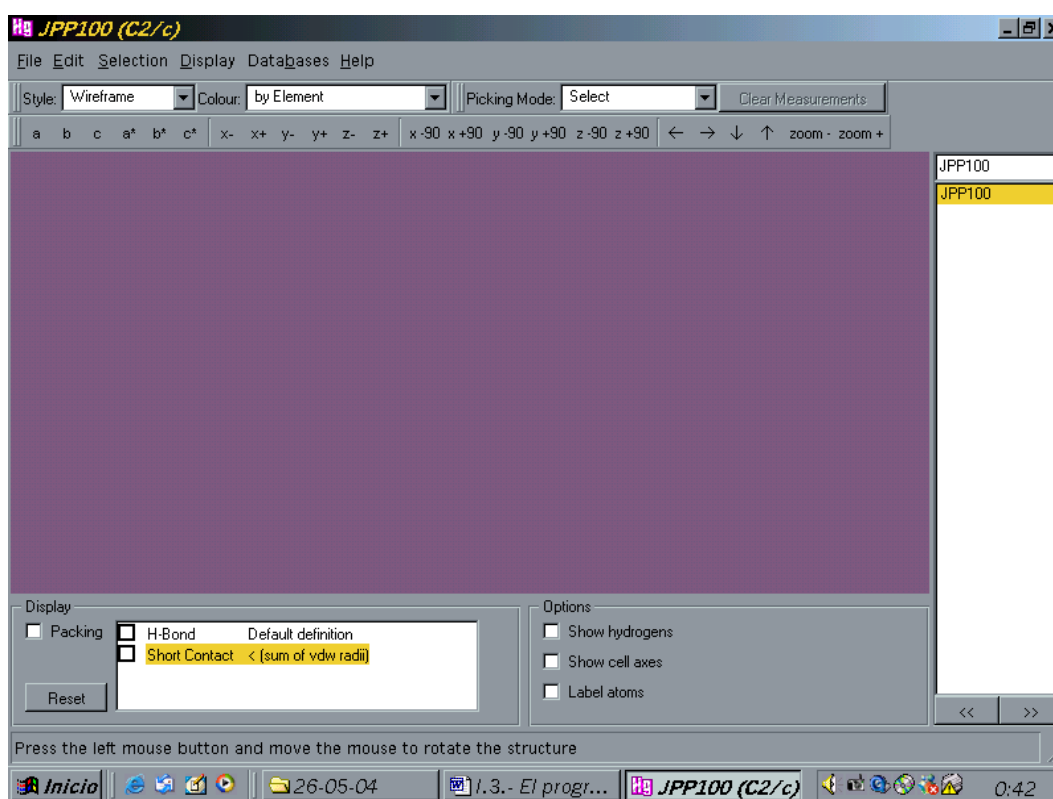


Figura 31.- Pantalla principal del programa

Entre las operaciones que se pueden realizar destacan las siguientes (Figuras 32 a 36):

- Visualizar estructuras cristalinas cuyos datos están guardados en diferentes formatos (*cif*, *pdb*, *mol*, etc.).
- Rotar y trasladar en la pantalla del ordenador estructuras cristalinas en 3D y visualizar sus ejes de celda y planos Miller.

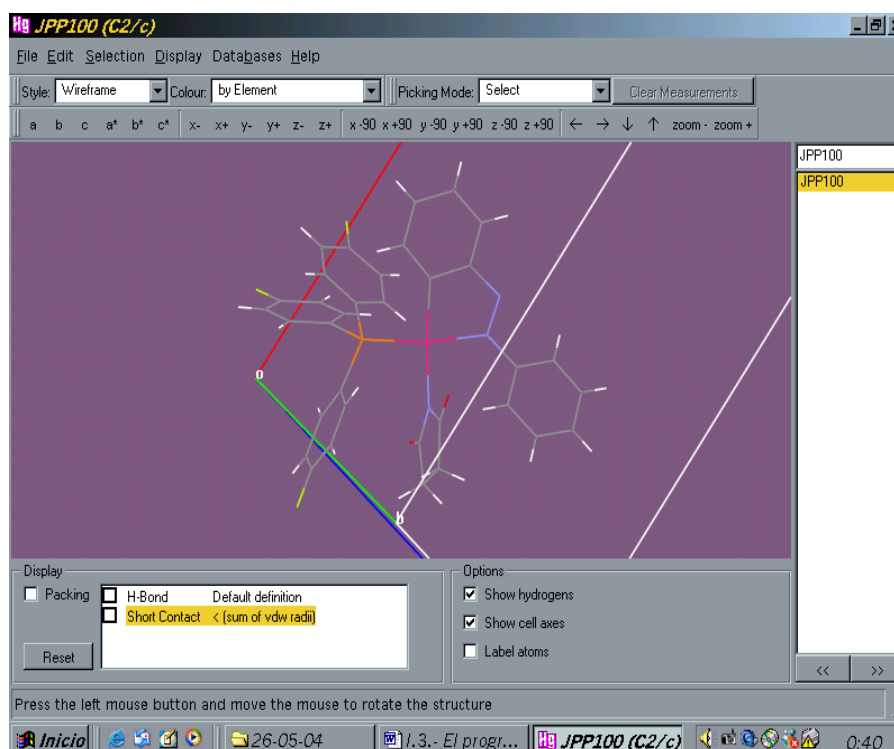


Figura 32

- Modificar la presentación de las estructuras variando el color y estilo de sus átomos y enlaces así como el color del fondo de pantalla. Asimismo, tiene la capacidad de ocultar los átomos que se desee, de volver a visualizarlos y de etiquetarlos.

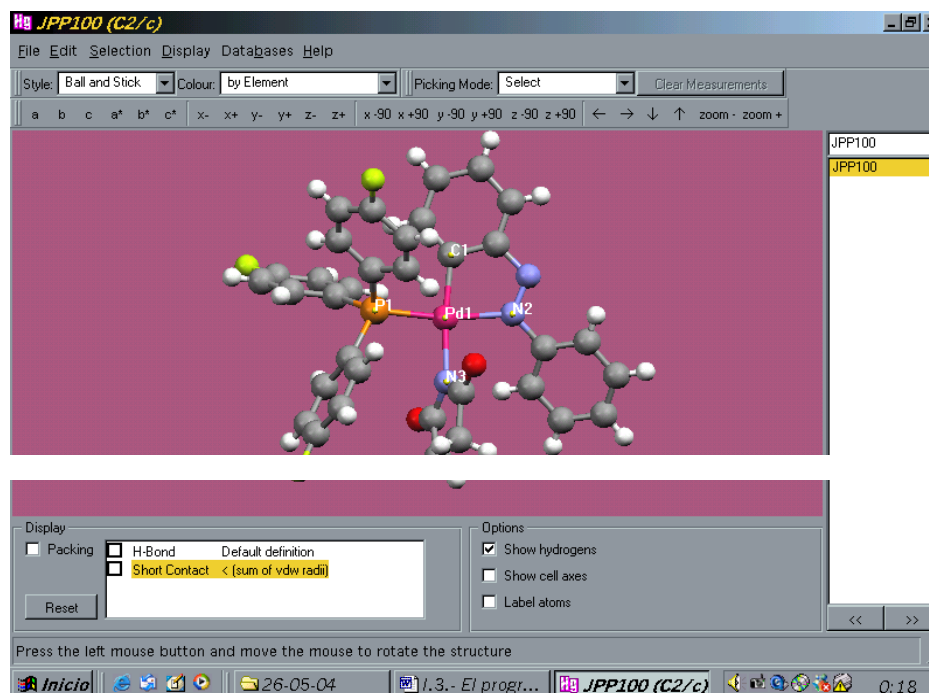


Figura 33

- Medir distancias, ángulos y ángulos de torsión de los átomos seleccionados.

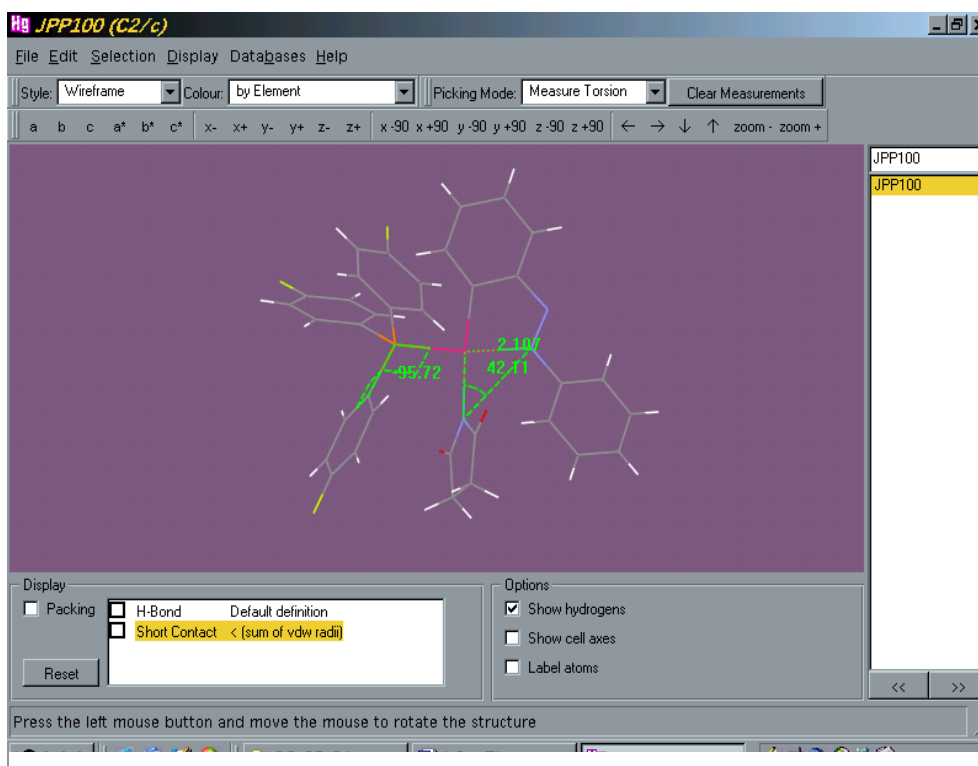


Figura 34

- Guardar las modificaciones realizadas, pudiendo utilizar las imágenes obtenidas en otras aplicaciones.
- Localizar y visualizar, si los hay, enlaces de hidrógeno intra e intermoleculares.
- Variar discrecionalmente el tamaño de la estructura respecto al de la pantalla con la finalidad de hacer crecer y visualizar la red cristalina en la dirección deseada.

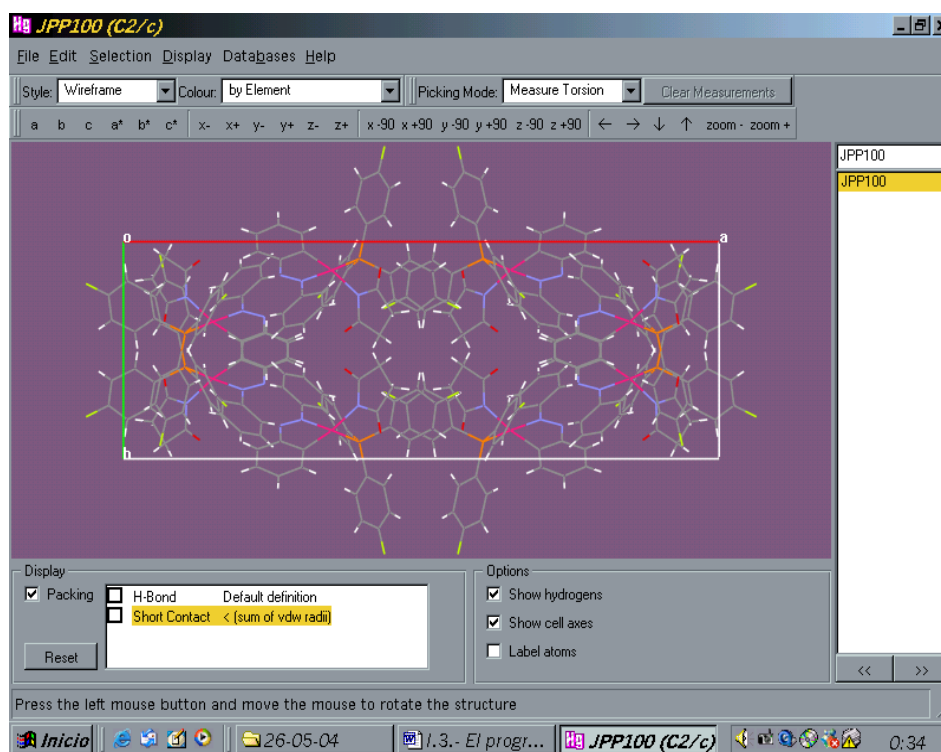


Figura 35

- Trazar planos entre los átomos señalados. Estos planos se pueden visualizar mejor coloreándolos mediante la extensa gama que ofrece la paleta de colores.

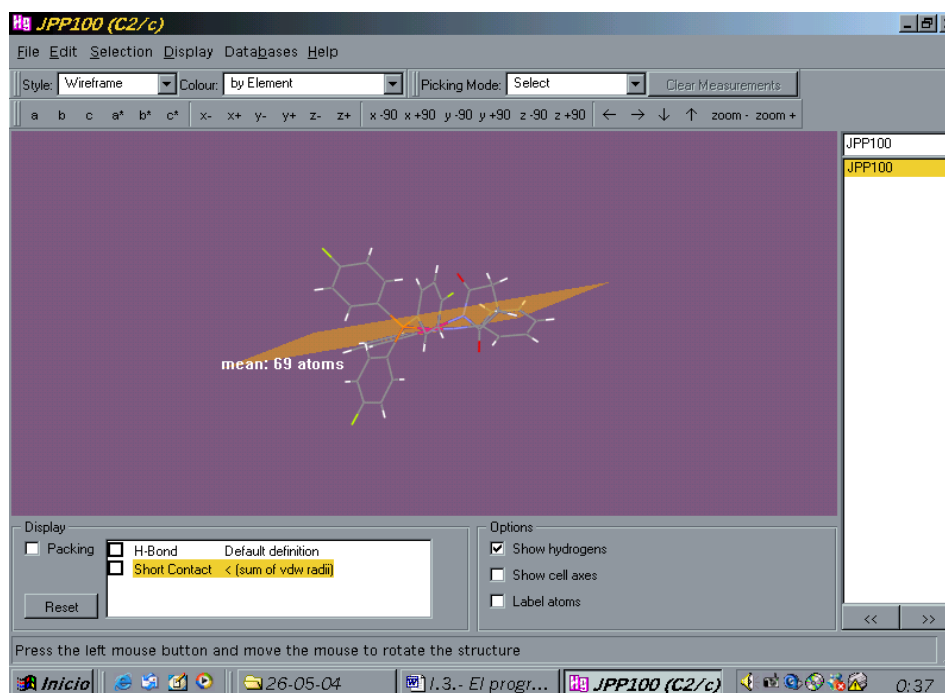


Figura 36

El programa no permite medir distancias y ángulos entre planos lo que supone un gran inconveniente a la hora de estudiar el empaquetamiento. Recientemente se ha publicado un trabajo⁴⁵ sobre “*nuevo software para búsquedas en la Cambridge Structural Database y visualización de las estructuras cristalinas*” en las que se pone de manifiesto el futuro inmediato del programa Mercury. Desgraciadamente, no se prevé que sea posible realizar las citadas medidas.

II.1.2.- Programas específicos

II.1.2.1.- Implementación en Excel de un algoritmo estadístico de clasificación de conformaciones de n miembros

El profesor Mathieu Kessler, del Área de Estadística e Investigación Operativa del Departamento de Matemática Aplicada y Estadística de la Universidad Politécnica de Cartagena ha diseñado, a petición del Área de Química Inorgánica, un programa de *Excel* para realizar el análisis estadístico de una serie de datos experimentales (los ángulos de torsión de las configuraciones) y comprobar, a partir de este análisis, a qué configuración pertenecen de entre las teóricamente posibles.

El programa se ha desarrollado de una manera flexible y eficiente para que nosotros, los usuarios, podamos realizar pruebas no sólo para las 10 configuraciones de los anillos de 8 miembros, sino para cualquier otro número de configuraciones y átomos. El límite fijado es de 15 átomos y 30 configuraciones, lo que, de momento, satisface las necesidades del Área. El programa dispone, por defecto, de 8 átomos y 10 configuraciones.

Los datos –los 8 ángulos de torsión– deben disponerse en filas, independientemente de la posición de la columna de inicio y se debe dejar siempre en blanco la primera fila ya que ésta hará funciones intermedias a la hora de crear gráficas a partir de la macro correspondiente.

Una vez introducidos los datos se procede a ejecutar la macro estadística, que se encarga de desarrollar la función de probabilidad estadística denominada

$$h = \frac{g(y_1, y_2, \dots, y_{na}, c)}{\sum_{p=1}^{nc} g(y_1, y_2, \dots, y_{na}, p)},$$

donde na es el número de átomos predeterminado, c es la configuración particular para cada caso y p es el peso de cada una de las configuraciones desde 1 hasta el número total de configuraciones, nc .

El significado de la función g no se considera necesario para el correcto desarrollo del programa estadístico por lo que se omite su definición.

La ejecución de la macro se realiza mediante la secuencia de comandos Herramientas → Macro → Macros → *Función_H*, ubicándose siempre en la primera celda de cada serie. La macro se puede ejecutar de forma más simple y automatizada presionando simultáneamente Ctrl+Mayús+H y retornando siempre a la primera celda de la serie siguiente. De esta manera, la última columna de creación de datos indica, mediante un número, cuál es la configuración a la que pertenece el mayor valor de la función h creada nc veces. En nuestro estudio ese número variará desde 1 para la configuración ***crow*** (CR) hasta 10 para la ***twist boat chair*** (TBC).

En el programa se añade un archivo con el formato específico para 8 átomos (en negro) y 10 configuraciones (en rojo), más la celda de la configuración más probable (en verde), además de la primera fila coloreada de amarillo como recordatorio de que debemos dejarla siempre libre.

Como ejemplo explicatorio utilizamos la estructura de *refcode* TILPEJ. Previamente se han introducido en *Excel* los ángulos de torsión (ver Apéndice 1), utilizando comas como separador entre la parte entera y la decimal:

-44,356 -58,57 88,539 -76,725 44,356 58,57 -88,539 76,725

Ahora nos colocamos sobre la primera celda –en este caso la de valor -44,356– y pulsamos Ctrl+Mayús+H. El resultado es:

3,223E-207 4,265E-122 4,427E-123 3,869E-121 3,1218E-06 0,99999688
6,058E-204 3,533E-208 7,5651E-47 1,0219E-19 6.

Esto significa que la conformación más probable es la número **6**, la ***twist chair***, con una probabilidad de 0,99999688. Los restantes resultados son ínfimos.

Para poder valorar la potencia discriminatoria del algoritmo vamos a repetir el proceso para una configuración en la que la asignación no es tan contundente. Para ello utilizamos los datos de la estructura cuyo *refcode* es COQMIE-1. Omitimos los valores de los ángulos de torsión y exponemos los resultados de la aplicación de la macro:

0,51843171 1,005E-112 1,324E-115 3,908E-112 3,006E-189 3,59E-192
0,33299168 0,14857661 1,8236E-71 7,695E-125 1.

Esto significa que la configuración más probable es la **1**, *crow*n, pero su valor es sensiblemente inferior a 1. Por tanto, las configuraciones más probables son, por este orden, la **1** (ya señalada), la **7** (*twist chair chair*) y la **8** (*chair chair*). En este ejemplo los valores no despreciables serían:

0,51843171 (estructura **1**), 0,33299168 (**7**) y 0,14857661 (**8**)

Los restantes valores son despreciables y prueba de ello es que la suma de los anteriores no despreciables es 1.00000000.

Este resultado, al igual que el de la estructura anterior, concuerda con el de otro algoritmo, desarrollado en el Área de Química Inorgánica, que vamos a explicar a continuación.

II.1.2.2.- Método para asignación de conformaciones y medida del grado de deformación de las mismas

Un método para asignar la conformación más probable a cada una de las distintas estructuras obtenidas en la base de datos consiste en comparar el valor de los 8 ángulos de torsión de cada una de ellas con las 78 combinaciones de los valores teóricos de las 10 conformaciones definidas para anillos de ocho miembros (ver Tabla 5).

Tabla 5

Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
Crown	87.5	-87.5	87.5	-87.5	87.5	-87.5	87.5	-87.5
CR1	87.5	-87.5	87.5	-87.5	87.5	-87.5	87.5	-87.5
CR2	-87.5	87.5	-87.5	87.5	-87.5	87.5	-87.5	87.5

Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
Boat boat	52.5	52.5	-52.5	-52.5	52.5	52.5	-52.5	-52.5
BB1	52.5	52.5	-52.5	-52.5	52.5	52.5	-52.5	-52.5
BB2	52.5	-52.5	-52.5	52.5	52.5	-52.5	-52.5	52.5
BB3	-52.5	-52.5	52.5	52.5	-52.5	-52.5	52.5	52.5
BB4	-52.5	52.5	52.5	-52.5	-52.5	52.5	52.5	-52.5

Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
Sofa	64.9	37.6	-64.9	-37.6	64.9	37.6	-64.9	-37.6
S1	64.9	37.6	-64.9	-37.6	64.9	37.6	-64.9	-37.6
S2	37.6	-64.9	-37.6	64.9	37.6	-64.9	-37.6	64.9
S3	-64.9	-37.6	64.9	37.6	-64.9	-37.6	64.9	37.6
S4	-37.6	64.9	37.6	-64.9	-37.6	64.9	37.6	-64.9

Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
Boat	-73.5	0	73.5	0	-73.5	0	73.5	0
B1	-73.5	0	73.5	0	-73.5	0	73.5	0
B2	0	73.5	0	-73.5	0	73.5	0	-73.5
B3	73.5	0	-73.5	0	73.5	0	-73.5	0
B4	0	-73.5	0	73.5	0	-73.5	0	73.5

Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
Chair	119.9	-76.2	0	76.2	-119.9	76.2	0	-76.2
C1	119.9	-76.2	0	76.2	-119.9	76.2	0	-76.2
C2	-76.2	0	76.2	-119.9	76.2	0	-76.2	119.9
C3	0	76.2	-119.9	76.2	0	-76.2	119.9	-76.2
C4	76.2	-119.9	76.2	0	-76.2	119.9	-76.2	0
C5	-119.9	76.2	0	-76.2	119.9	-76.2	0	76.2
C6	76.2	0	-76.2	119.9	-76.2	0	76.2	-119.9
C7	0	-76.2	119.9	-76.2	0	76.2	-119.9	76.2
C8	-76.2	119.9	-76.2	0	76.2	-119.9	76.2	0

Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
<i>Twist chair</i>	37.3	-109.3	109.3	-37.3	-37.3	109.3	-109.3	37.3
TC1	37.3	-109.3	109.3	-37.3	-37.3	109.3	-109.3	37.3
TC2	-109.3	109.3	-37.3	-37.3	109.3	-109.3	37.3	37.3
TC3	109.3	-37.3	-37.3	109.3	-109.3	37.3	37.3	-109.3
TC4	-37.3	-37.3	109.3	-109.3	37.3	37.3	-109.3	109.3
TC5	-37.3	109.3	-109.3	37.3	37.3	-109.3	109.3	-37.3
TC6	109.3	-109.3	37.3	37.3	-109.3	109.3	-37.3	-37.3
TC7	-109.3	37.3	37.3	-109.3	109.3	-37.3	-37.3	109.3
TC8	37.3	37.3	-109.3	109.3	-37.3	-37.3	109.3	-109.3

Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
<i>Twist chair chair</i>	56.2	-82.4	114.6	-82.4	56.2	-82.4	114.6	-82.4
TCC1	56.2	-82.4	114.6	-82.4	56.2	-82.4	114.6	-82.4
TCC2	-82.4	114.6	-82.4	56.2	-82.4	114.6	-82.4	56.2
TCC3	114.6	-82.4	56.2	-82.4	114.6	-82.4	56.2	-82.4
TCC4	-82.4	56.2	-82.4	114.6	-82.4	56.2	-82.4	114.6
TCC5	-56.2	82.4	-114.6	82.4	-56.2	82.4	-114.6	82.4
TCC6	82.4	-114.6	82.4	-56.2	82.4	-114.6	82.4	-56.2
TCC7	-114.6	82.4	-56.2	82.4	-114.6	82.4	-56.2	82.4
TCC8	82.4	-56.2	82.4	-114.6	82.4	-56.2	82.4	-114.6

Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
<i>Chair chair</i>	66.0	-105.2	105.2	-66.0	66.0	-105.2	105.2	-66.0
CC1	66.0	-105.2	105.2	-66.0	66.0	-105.2	105.2	-66.0
CC2	-105.2	105.2	-66.0	66.0	-105.2	105.2	-66.0	66.0
CC3	105.2	-66.0	66.0	-105.2	105.2	-66.0	66.0	-105.2
CC4	-66.0	66.0	-105.2	105.2	-66.0	66.0	-105.2	105.2
CC5	-66.0	105.2	-105.2	66.0	-66.0	105.2	-105.2	66.0
CC6	105.2	-105.2	66.0	-66.0	105.2	-105.2	66.0	-66.0
CC7	-105.2	66.0	-66.0	105.2	-105.2	66.0	-66.0	105.2
CC8	66.0	-66.0	105.2	-105.2	66.0	-66.0	105.2	-105.2

Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
<i>Boat chair</i>	65.0	44.7	-102.2	65.0	-65.0	102.2	-44.7	-65.0
BC1	65.0	44.7	-102.2	65.0	-65.0	102.2	-44.7	-65.0
BC2	44.7	-102.2	65.0	-65.0	102.2	-44.7	-65.0	65.0
BC3	-102.2	65.0	-65.0	102.2	-44.7	-65.0	65.0	44.7
BC4	65.0	-65.0	102.2	-44.7	-65.0	65.0	44.7	-102.2
BC5	-65.0	102.2	-44.7	-65.0	65.0	44.7	-102.2	65.0
BC6	102.2	-44.7	-65.0	65.0	44.7	-102.2	65.0	-65.0
BC7	-44.7	-65.0	65.0	44.7	-102.2	65.0	-65.0	102.2
BC8	-65.0	65.0	44.7	-102.2	65.0	-65.0	102.2	-44.7
BC9	-65.0	-44.7	102.2	-65.0	65.0	-102.2	44.7	65.0
BC10	-44.7	102.2	-65.0	65.0	-102.2	44.7	65.0	-65.0
BC11	102.2	-65.0	65.0	-102.2	44.7	65.0	-65.0	-44.7
BC12	-65.0	65.0	-102.2	44.7	65.0	-65.0	-44.7	102.2
BC13	65.0	-102.2	44.7	65.0	-65.0	-44.7	102.2	-65.0
BC14	-102.2	44.7	65.0	-65.0	-44.7	102.2	-65.0	65.0
BC15	44.7	65.0	-65.0	-44.7	102.2	-65.0	65.0	-102.2
BC16	65.0	-65.0	-44.7	102.2	-65.0	65.0	-102.2	44.7

Config.	τ_1	τ_2	τ_3	τ_4	τ_5	τ_6	τ_7	τ_8
<i>Twist boat chair</i>	88.0	-93.2	51.9	44.8	-115.6	44.8	51.9	-93.2
TBC1	88.0	-93.2	51.9	44.8	-115.6	44.8	51.9	-93.2
TBC2	-93.2	51.9	44.8	-115.6	44.8	51.9	-93.2	88.0
TBC3	51.9	44.8	-115.6	44.8	51.9	-93.2	88.0	-93.2
TBC4	44.8	-115.6	44.8	51.9	-93.2	88.0	-93.2	51.9
TBC5	-115.6	44.8	51.9	-93.2	88.0	-93.2	51.9	44.8
TBC6	44.8	51.9	-93.2	88.0	-93.2	51.9	44.8	-115.6
TBC7	51.9	-93.2	88.0	-93.2	51.9	44.8	-115.6	44.8
TBC8	-93.2	88.0	-93.2	51.9	44.8	-115.6	44.8	51.9
TBC9	-88.0	93.2	-51.9	-44.8	115.6	-44.8	-51.9	93.2
TBC10	93.2	-51.9	-44.8	115.6	-44.8	-51.9	93.2	-88.0
TBC11	-51.9	-44.8	115.6	-44.8	-51.9	93.2	-88.0	93.2
TBC12	-44.8	115.6	-44.8	-51.9	93.2	-88.0	93.2	-51.9
TBC13	115.6	-44.8	-51.9	93.2	-88.0	93.2	-51.9	-44.8
TBC14	-44.8	-51.9	93.2	-88.0	93.2	-51.9	-44.8	115.6
TBC15	-51.9	93.2	-88.0	93.2	-51.9	-44.8	115.6	-44.8
TBC16	93.2	-88.0	93.2	-51.9	-44.8	115.6	-44.8	-51.9

Para ello, utilizando el programa *Excel*, se define una función f , que aplicaremos 78 veces a cada uno de los 78 fragmentos que deseamos estudiar:

desde:

$$f(1) = [((\$Bn-\$B\$1)^2+(\$Cn-\$C\$1)^2+(\$Dn-\$D\$1)^2+(\$En-\$E\$1)^2+(\$Fn-\$F\$1)^2+(\$Gn-\$G\$1)^2+(\$Hn-\$H\$1)^2+(\$In-\$I\$1)^2)]^{0.5}$$

hasta

$$f(78) = [((\$Bn-\$B\$78)^2+(\$Cn-\$C\$78)^2+(\$Dn-\$D\$78)^2+(\$En-\$E\$78)^2+(\$Fn-\$F\$78)^2+(\$Gn-\$G\$78)^2+(\$Hn-\$H\$78)^2+(\$In-\$I\$78)^2)]^{0.5}$$

Sea por ejemplo, la estructura de *refcode* TILPEJ cuyos 8 ángulos de torsión son **-44,356, -58,57, 88,539, -76,725, 44,356, 58,57, -88,539 y 76,725°**.

Al aplicar $f(1)$ estamos utilizando la primera serie de valores, definida en la Tabla 5 como CR1:

$$f(1) = [(87.5 - (-44,356))^2 + (-87.5 - (-58,57))^2 + (87.5 - 88,539)^2 + (-87.5 - (-76,725))^2 + (87.5 - 44,356)^2 + (-87.5 - 58,57)^2 + (87.5 - (-88,539))^2 + (-87.5 - (76,725))^2]^{0.5} \text{ cuyo valor es 315.}$$

Al aplicar $f(78)$ estamos utilizando la última serie de valores, definida como TBC16:

$$f(78) = [(93.2 - (-88,501))^2 + (-88.0 - (-13,036))^2 + (93.2 - 77,971)^2 + (-51.9 - (-6,15))^2 + (-44.8 - (-43,816))^2 + (115.6 - (-47,223))^2 + (-44.8 - 92,029)^2 + (-51.9 - (26,797))^2]^{0.5} \text{ cuyo valor es 224.}$$

El menor valor es 63 y corresponde a la configuración denominada TC4. El segundo valor más bajo es 81 para la configuración C7, y así sucesivamente hasta los 78 casos posibles.

Por tanto, a esta estructura, podemos asignarle una conformación *twist chair* en la que, además, sabemos que los ángulos de torsión tienen el orden correspondiente a TC4, es decir, **-37.3, -37.3, 109.3, -109.3, 37.3, 37.3, -109.3 y 109.3** (ver Tabla 5), valores relativamente aproximados a los experimentales recogidos arriba.

Este simple método permite, además, medir el grado de distorsión global de la conformación si aceptamos que, por ejemplo, para una deformación de entre 0 y 5° el valor calculado para ese intervalo varía entre 0 y $[8 \times (5 - 0)^2]^{0.5} = 14$.

De este modo los valores de la función variarán como se resume a continuación:

Variación de la deformación (°)	Intervalo de valores
0 → 5	0 → 14
5 → 10	15 → 28
10 → 15	29 → 42
15 → 20	43 → 56
20 → 25	57 → 71
25 → 30	72 → 85
30 → 35	86 → 99
35 → 40	100 → 113
40 → 45	114 → 127
45 → 50	128 → 141
50 → 55	142 → 156
55 → 60	157 → 170

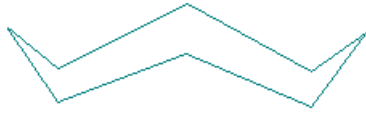
Por tanto, el valor de 63 obtenido para la conformación objeto de nuestro estudio se encuentra en el intervalo 57 → 71 correspondiente a una deformación comprendida entre 20 → 25° (22° aproximadamente). En definitiva, la conformación más probable la denominaremos “TC4 deformada más de 22°”.

II.1.3.- Las 10 conformaciones del ciclooctano generadas por el programa *Hyperchem*

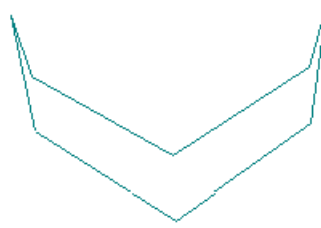
Las figuras correspondientes a las 10 conformaciones del ciclooctano (ver las dos páginas siguientes) se crearon mediante el software para modelado molecular *Hyperchem Release 7.01* (versión *Windows*)⁵⁴. Para ello, primero se construyó un anillo de ocho miembros mediante las opciones *default element* y *model build* desde el menú *BUILD*. Seguidamente, seleccionando los valores de los ángulos de torsión propuestos por Hendrickson³⁸, se crearon las distintas formas canónicas mediante la opción *constrain bond torsion* del mismo menú. Una vez fijados todos los ángulos de torsión para una figura determinada, se seleccionó la opción *add hydrogen & model build* dentro del menú *BUILD*. Así se obtuvieron, uno a uno, los 10 archivos (con la extensión *hin*) de las conformaciones. Estos archivos sólo se pueden abrir desde *Hyperchem*. Por ello, se convirtieron a otro formato mediante la opción *save as* del menú *FILE* del propio *Hyperchem*. En nuestro caso se pasó a la extensión *pdb* con la finalidad de poder dibujar las figuras con el programa *Windows*.

Las figuras creadas servirán de apoyo a la hora de visualizar con el programa *Mercury* las estructuras objeto de estudio y poder así contrastarlas con las obtenidas mediante el uso de los programas específicos explicados anteriormente.

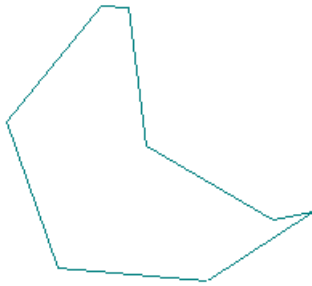
(*) *Hyperchem*TM ; *Hypercube Inc.* : 1115 NW 4th Street, Gainesville, Florida 32601, USA.



CROWN



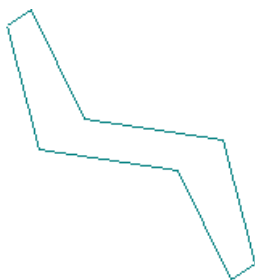
BOAT-BOAT



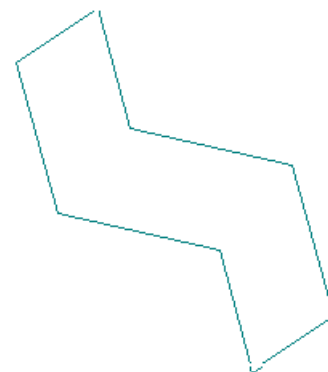
TWIST BOAT (SOFA)



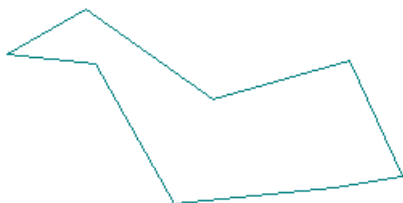
BOAT



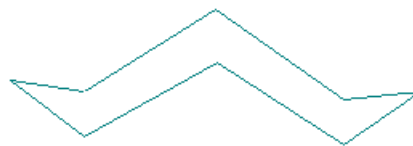
CHAIR



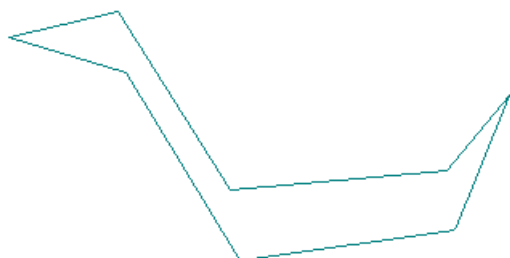
TWIST-CHAIR



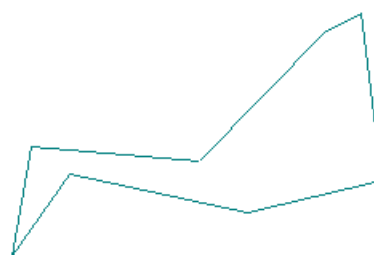
TWIST-CHAIR-CHAIR



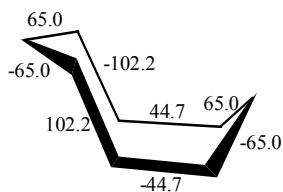
CHAIR-CHAIR



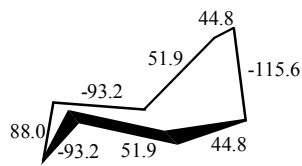
BOAT-CHAIR



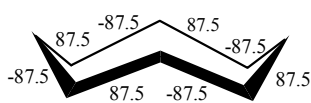
TWIST-BOAT-CHAIR



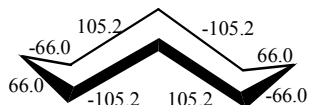
Boat-Chair (C_3)



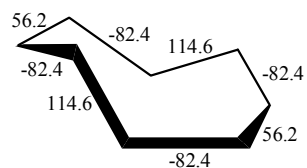
Twist-Boat-Chair (C_2)



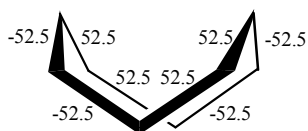
Crown (D_{4d})



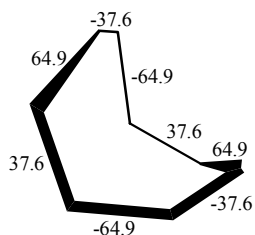
Chair-Chair (C_{2v})



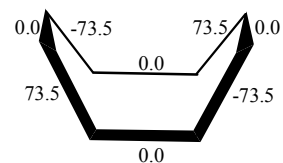
Twist-Chair-Chair (D_2)



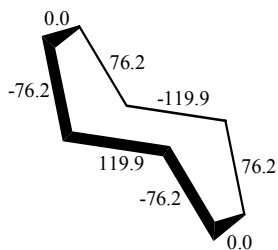
Boat-Boat (D_{2d})



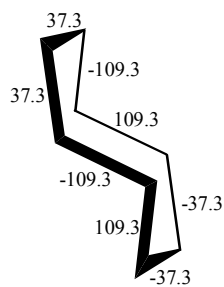
Twist-Boat (S_4)



Boat (D_{2d})



Chair (C_{2h})



Twist-Chair (C_{2h})

II.2.- SELECCIÓN DE LAS ESTRUCTURAS

El programa *ConQuest* permite obtener los datos estructurales de cada uno de los 409 compuestos seleccionados según la búsqueda comentada anteriormente, presentándolos uno a uno de la forma que se recoge en la Figura 37 para el compuesto de *refcode* TILPEJ:

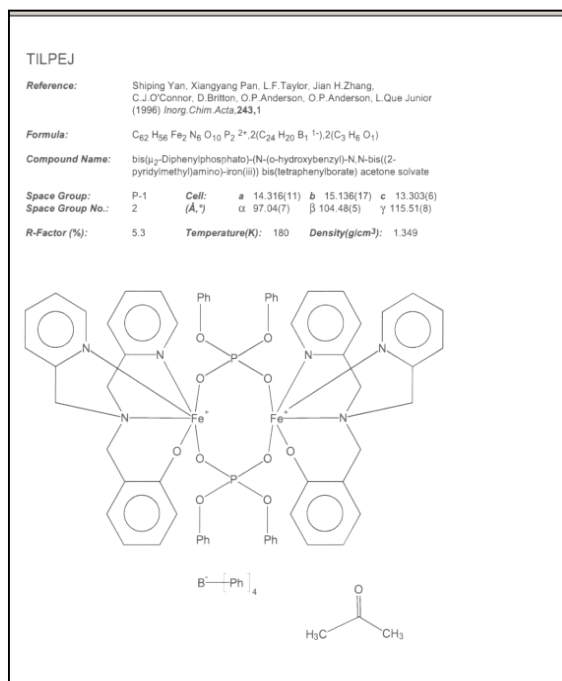


Figura 37.- Presentación de datos para la estructura de *refcode* TILPEJ

Los datos estructurales consisten en:

- *Refcode*
- Fórmula empírica
- Nombre del compuesto
- Sistema cristalino
- Parámetros de celda
- *R*-factor (%)
- Temperatura
- Densidad.

Con este programa y con el programa *Mercury* se han seleccionado visualmente, no por ordenador, los 409 complejos dinucleares que presentan doble puente con la función fosfato, desechando, por tanto, los fosfonatos y los fosfinatos, que no serán objeto de nuestro estudio. En la Tabla 6 se presentan los *refcode* de los 409 compuestos (ver página siguiente).

<i>Refcode</i>			
ACAVUC	FILQIA	KIQGUM	NEBTOD
ACUBAB	FINHIT	LAHQEQ	NECPEQ
ACUBEF	FOPBOB01	LAHQIU	NECPIU
ALPETT	FUQBEB	LEHZAZ	NEHWUS
ALPETT01	FUQBEB01	LEHZAZ10	NEJCOU
ATPPZN10	GARKIT	LEPGAO	NEJCUA
BADFOC	GIQGES	LEPKEW	NEJDAH
BAGDAP	GIQGES01	LEXREL	NENFAN
BEGQAF	GITMAX	LEXREL10	NEPREF
BIJXUN10	GITMEB	LEXRIP**	NIQGOJ
BIQFOW	GIVDOE	LEXRIP10**	NOHSOS
BIWLIC	GIXBUK	LEXROV	NONKAC
BORFAP	GIXCAR	LEXROV10	NUKHUW
BUQCIZ	GIXCEV	LEXRUB	OBERAO
BUVFED	GMPCUP	LEXRUB10	OCEFEH
CADPIH	GOSRIP	LEYCAT	OFABOM
CAGWAI	GUCPEZ	LEYYET	PAQJUM
CAGWIQ	GUNCOH	LIMJUM	PAQPIG
CAJFAU	GUQTOB	LISVUE	PEKKIZ
CARSUJ	HEHWAS	LIVKUW	PEVQIQ
CAYKOC	HIBQUE	LIWJAC	PIMTAG
COBFOO	HILYUW	LOBCOU	PIMTIO
COQMIE	HOWLOO	LOFZUB	PIQFUQ
COQNIF	HIWLUU	LOGBEO	PIQGAX
CUMPA	HOGCAH**	LOKMED	PITMIO
CUHCIR	HOPYEQ	LOKMED01	PITMOU
CUMPAH10	HOPYEQ01	MAPBEK	PONPOX
DASDUW	IBOSAT	MAPCIP	POVMOC
DASDUW10	IBOSIB	MARJAQ	POXMEU
DIFQIS	IBOTAU	MAYFUN	PPOSMG
DORYEO	ICAGAU	MECLEL	PUPYAA
DOWQIP	IFAHEC	MEJGEN	QADSUJ
DOXHAZ	JAGRUE	MEQHOF**	QAJKIV
DOZFUT10	JAGSAL	MEQJAT**	QAJKOB
EBARII**	JAGSEP	MEQJEX**	QAMLIZ
EBEXOY	JASJOC	MEWWUG	QAMLOF
ECIYEU	JEBXAP	MEXDEY	QAMLUL
ECOLOX	JEVXEN	MEXDIC	QAMMAS
EDEPOS	JIVQOU	MEXDOI	QAMMOG
EDUNOG	JIVQUA	MICNOB	QAMMUM
EDUZOS	JIYNIO	MINWEL	QANJOE
EFABAO	JIYPIQ	MINWIP	QATNII
EFILUA	JOGJEU	MOGYUC**	QATNOO
EFIMOV	JOGJIY	NAKQAR	QAXPOU
EFIMUB	JUXYEG	NALJIT	QAXQAH01
FACMON	KAFHAA	NASBIS	QAXQUB
FADKUQ	KAFHAA01	NATMUQ	QAXRAI
FAFGY	KEDGIJ	NAYFAU	QAXREM
FEBYOA20	KEJQAR	NAYPIM	QAXRIQ
FEPQEW	KINMID	NEBTIX	QAXRUC

QAXSAJ	ROBVOT	WANRUY01	ZUZHIL**
QAXWIV	ROBVUZ	WAVQUF	ZZZMG101
QECMUG	ROBWAG	WETYAV	CAHBET
QEC PAP	ROKHEE	WEWXAX	CAHFOH
QECPIX01	SBMPOB	WEXQUL	CAHQOS
QECPIX02	SETJOQ	WIHHUQ	CAHSOU
QEKKAS	SIBMOF	WIJTOY	CAHVAJ
QEKKEW	SIGQOO	WODPIO	CAHVEN
QEKKIA	SINQIP	WOGHOP	CALCUO
QEKKOG	SINVAM	WOGHUV	EGEQIQ
QEQTIP	SIQFEQ	WOGHUV01	LOWXOK
QE QZIV	SIQFUT	WOJCUT	LOXSEW
QERCEV	SOMROB	WONRUM	LUBVIN
QIFCAJ	SUXHAU	WONRUM01	LUBVOT
QIWDOP	SUZCUL	WONRUM02	LUHGIE
QOBWEJ	TACZUS**	WOQYUW	MOJZEQ**
QOBWEJ01	TATYAO	WOWGUK	MOJZUG
QOBWIN	TAWHOO	XACPAS	MOPBAU
QOBWIN01	TEMHUO	XACPEW	MOQNUB
QOBZEM	TEMJAW	XACPOG	MUHPUA
QOFKOL	TETZEX	XACQAT	OFITUS
QOFYIT	TIDQIG	XACQEX	OFIVII
QOMVUJ	TILPEJ	XAKCUH	OFIVOO
QOPDEE**	TOCZUG	XAKDES	OGEMIW
QOSSOG**	TODBET	XAKDIW	PACDUT
QOSSUM	TOQCEH	XAKDIW01	QOFKOL01
QOSZIH	TOQCIL	XAQTEO	UGELIB
QOXGAL	TOZDOB	XAQTEO01	WOXRIK
QOZFIU	TOZDUH	XAQTIS	WOXSAD
QOZZUA	TOZFIX**	XAQTOY01	WOYJOJ
QUBBAQ	TUDDEB	XEXREX	WOZLAY
QUFGED**	TUFXIB	XICDOC01**	WOZLEC
QUFGIH**	UBEF AI	XILCEA	XAKDES02
QUJCON	UBEFEM	XIQHIO	XILCEA01
QUJCUT	UBEPUM	XISKUF	XODRIR
QURCAH	UBEPUM01	XISLAM	XOJZUR
RABNOX	UCOJUR	XISZUU	XORCAI
RABQEQ	UCOKAY	XIWKUJ	XORDEN
RABQIU	UDOJAY	XIWYEH	XOSPOK
RAPBOZ	UFAQEX	XIZCIS	XOSPUQ
RAQVAG	VADKEQ	XIZHET	XOSQUR
REBSUM	VADMES	YaqBUN	XOTPOL
RECROG	VAZTOF	YEDDEQ	XOWKAV
REGJUI	VIRQES	YIKQIS**	XOXHEX
REHQUQ	VOGQEN	YISDAF	XOXHIB
RIHTIL	VOHQEO	YOMTAV	XOXHIB01
RITJUZ**	VOHQIS	ZALBAP	XOXKAW
RITKAG**	VUFHEJ	ZAQZOG	ZEHBUJ02
RITKIO**	VUNC EM	ZIMMOX	
RIYVUQ	VUNC EM01	ZIMVOG	
ROBQII	VUPTIJ	ZIMVUM	
ROBVIN	WANRUY	ZOTHUL	

Tabla 6.- *refcode* de los 409 compuestos seleccionados